

На правах рукописи



Вихарев Сергей Викторович

Волновое управление ростом двойникованных кристаллов
мартенсита и формированием профилей кристаллов в
неоднородной среде для $\gamma - \alpha$ превращения
в сплавах на основе железа

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Специальность 01.04.07 — физика конденсированного состояния

Екатеринбург — 2010

Работа выполнена в Государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Уральский государственный лесотехнический университет»

Научный руководитель — доктор физико-математических наук, профессор
Кащенко Михаил Петрович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Пушин Владимир Григорьевич
доктор физико-математических наук, профессор
Шур Владимир Яковлевич

Ведущая организация — Национальный исследовательский технологический
университет «МИСиС», г. Москва

Защита состоится 3 декабря 2010 г. в 15:00 на заседании диссертационного совета Д 212.285.02 при ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина» по адресу: 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19, зал заседаний Ученого совета (главный учебный корпус, 1-я римская).

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке УрФУ имени первого Президента России Б. Н. Ельцина.

Автореферат разослан 29 октября 2010 г.

Ученый секретарь совета,
доктор физико-математических наук



Пилипенко Г. И.

Примечание: отзывы на автореферат, заверенные гербовой печатью организаций, просим присылать в 2-х экз. на адрес университета.

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Построение динамической модели формирования мартенситного кристалла при ярко выраженных структурных переходах первого рода реконструктивного типа в качестве одного из важнейших компонентов должно включать адекватное экспериментальным фактам описание процесса образования регулярной двойниковой структуры. Подобная структура возникает, например, при $\gamma - \alpha$ (ГЦК-ОЦК или ГЦК-ОЦТ) мартенситном превращении в сплавах на основе железа, обладающих относительно низкими температурами M_s начала мартенситной реакции. Важной особенностью $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения является сверхзвуковая скорость роста отдельного кристалла, по отношению к скоростям продольных упругих волн. Эта особенность применительно к росту кристалла была объяснена ранее в рамках концепции управляющего волнового процесса (УВП), в качестве компонент которого выступают относительно длинноволновые пучки продольных волн, распространяющиеся в ортогональных направлениях и несущие пороговую деформацию типа растяжение-сжатие. Эти пучки ответственны за формирование габитусной плоскости мартенситного кристалла и характеризуются длинами волн порядка толщины мартенситной пластины. Высказанное ранее предположение о связи двойниковой структуры с коротковолновыми компонентами смещений атомов (длины волн сопоставимы с периодом двойниковой структуры) в предшествующих исследованиях получило лишь частичное развитие и опиралось на ряд недостаточно обоснованных с физической точки зрения гипотез. Поэтому для развития динамической теории мартенситных превращений чрезвычайно актуально создать непротиворечивую модель формирования регулярной двойниковой структуры, совместимую со сверхзвуковой скоростью роста мартенситного кристалла. Корректное включение в структуру УВП коротковолновых компонент позволило бы развить модель управления ростом реальных мартенситных кристаллов в неоднородной среде.

Цель работы состоит в развитии и совершенствовании концепции волнового процесса, позволяющих перейти к описанию управления ростом реальных мартенситных кристаллов, обладающих тонкой двойниковой структурой и формирующихся в среде, содержащей значимые (мезомасштабные) неоднородности. Достижение этой цели потребовало решения следующих задач.

1. Сформулировать систему волновых уравнений, сопоставляемых процессу наложения пары волновых пучков, нарушающих устойчивость решетки исходной фазы и обеспечивающих сверхзвуковую скорость роста кристалла мартенсита и основных компоненты двойниковой структуры.

2. Обосновать выбор поперечных размеров $d_{1,2l}$ активной ячейки, порождающей распространение длинноволновых составляющих УВП, и уточнить выбор поперечных размеров $d_{1,2s}$ коротковолновой активной ячейки для формирования основной компоненты двойниковой структуры.
3. Дать последовательное обоснование снятия вырождения между двумя вариантами ориентаций границ компонент двойника, как следствия согласованного действия коротковолновых и длинноволновых компонент УВП при инициации процесса бейновской деформации.
4. Рассмотреть модели предпереходного состояния системы, способные, в принципе, описывать сверхзвуковое формирование регулярных двойниковых структур, совместимое со сверхзвуковой скоростью роста кристалла. В том числе, обосновать гипотезу о возможности воспроизведения единственной в начальный момент времени активной коротковолновой ячейки в области бегущего фронта длинноволновой компоненты УВП.
5. Исследовать, в рамках концепции УВП, влияние зависимости эффективного затухания управляющих волн от пространственных координат на форму профиля растущего кристалла для ряда математических моделей, качественно отражающих характер неоднородности.

Научная новизна

1. Предложена система двух волновых уравнений для волновых пучков, распространяющихся в ортогональных направлениях и иницирующих процесс потери устойчивости исходной фазы (аустенита).
2. Впервые обоснован выбор: а) поперечных размеров $d_{1,2l}$ начального возбужденного состояния решетки — на основе концепции гетерогенного зарождения мартенситного кристалла в упругом поле отдельной дислокации и б) поперечных размеров $d_{1,2s}$ — на основе представлений о согласованном распространении длинно- и коротковолновых компонент УВП.
3. Дана детальная интерпретация процесса отбора одного из двух возможных вариантов ориентаций границ между компонентами двойниковой структуры как следствия положительной обратной связи для развития главной бейновской деформации сжатия в решетке, теряющей устойчивость при пороговых деформациях, переносимых УВП.
4. Выполнен сравнительный анализ трех моделей предпереходного состояния решетки, способных описать сверхзвуковой процесс формирования двойниковых структур, совместимый со сверхзвуковой скоростью роста кристалла. Осуществлен выбор, в качестве предпочтительной, модели с единственной активной коротковолновой ячейкой в начальный момент времени, способной регулярно воспроизводиться в центральной области фронта УВП.

5. На основе динамической модели впервые предложены варианты описания пространственной неоднородности исходной фазы, позволяющие провести расчеты профилей мартенситных кристаллов, образующихся при распространении УВП в неоднородной среде.

Научная и практическая ценность работы. Проведенный в работе анализ и полученные результаты соответствуют развитию нового этапа динамической теории реконструктивных мартенситных превращений в сплавах на основе переходных металлов. Полученная новая информация позволяет расширить возможности реконструкции процесса динамики формирования мартенситного кристалла по набору наблюдаемых морфологических признаков, детальное изучение которых входит в традиционную сферу интересов физического металловедения.

Полученные выводы открывают перспективы как постановки направленных экспериментов по формированию регулярных слоистых структур, так и дальнейшего применения концепции УВП для описания вариантов взаимодействия реальных кристаллов с мезомасштабными неоднородностями среды (границы зерен, включений, пересечения кристаллов).

На защиту выносятся следующие положения.

1. Система двух волновых уравнений для волновых пучков, распространяющихся в ортогональных направлениях и инициирующих процесс потери устойчивости исходной фазы (аустенита).
2. Обоснование выбора: а) поперечных размеров $d_{1,2l}$ начального возбужденного состояния решетки — на основе концепции гетерогенного зарождения мартенситного кристалла в упругом поле отдельной дислокации и б) поперечных размеров $d_{1,2s}$ — на основе представлений о согласованном распространении длинно- и коротковолновых компонент УВП.
3. Интерпретация процесса снятия вырождения между двумя ортогональными вариантами ориентаций границ двойниковой структуры как следствия положительной обратной связи для развития главной бейновской деформации сжатия в решетке, теряющей устойчивость при пороговых деформациях, переносимых УВП.
4. Сравнительный анализ трех моделей предпереходного состояния решетки, способных описать сверхзвуковой процесс формирования двойниковых структур, совместимый со сверхзвуковой скоростью роста кристалла. Выбор, в качестве предпочтительной, модели с единственной активной коротковолновой ячейкой в начальный момент времени, способной регулярно воспроизводиться в центральной области фронта УВП.
5. Модельные варианты описания пространственной неоднородности исходной фазы, эффективные затухания волновых компонент (входящих в состав УВП) и характерные типы расчетных профилей мартенситных

кристаллов, образующихся при распространении УВП в неоднородной среде.

Апробация работы. Материалы диссертации были представлены на XLIV Международной конференции «Актуальные проблемы прочности» (Вологда, 2005 г.), Международной конференции ESOMAT 2006 (Bochum/Germany, 2006 г.), XLVI Международной конференции «Актуальные проблемы прочности» (Витебск, 2007г.), XVII Петербургских чтениях по проблемам прочности (Санкт-Петербург, 2007 г.), XVII Международной конференции «Физика прочности и пластичности материалов» (Самара, 2009г.), Международном симпозиуме «Перспективные материалы и технологии» (Витебск, 2009 г.), Бернштейновских чтениях по термической обработке металлических материалов (Москва, 2009 г.), XI Международной школе-семинаре «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (Барнаул, 2010).

Достоверность результатов работы базируется на тщательном анализе имеющихся литературных источников, прозрачности используемых физических аргументов, внутренней непротиворечивости работы и соответствии полученных выводов наблюдаемым экспериментальным фактам.

Личный вклад автора. На всех этапах работы (критический литературный обзор, постановка задачи, получение результатов и их интерпретация) автором внесен значимый вклад.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Она изложена на 131 странице машинописного текста, включая 37 рисунков, 3 таблицы и список литературы, содержащий 104 наименования.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность темы исследования, сформулирована цель диссертационной работы, описаны научная новизна, практическая ценность и основные защищаемые положения. Приводится информация об апробации работы, достоверности полученных результатов, личном вкладе автора и структуре диссертации.

В первой главе приводится информация, существенная для постановки задач исследования. А именно: освещаются основные представления о реконструктивных мартенситных превращениях (на примере $\gamma - \alpha$ превращения в сплавах на основе железа); раскрывается суть концепций гетерогенного зарождения и волнового роста кристаллов мартенсита; приводятся основные подходы к описанию двойниковой структуры; обсуждаются успехи и трудности, связанные с описанием прообраза двойниковой структуры в рамках волновой модели; формулируется развернутый перечень задач исследования.

В частности, при описании процесса формирования двойникованных кристаллов центральной является проблема синхронизации коротковолновых и длинноволновых компонент управляющего волнового процесса, позволяющей обеспечить сверхзвуковой рост основной компоненты двойника и самого мартенситного кристалла. Гипотеза о согласованном действии длинноволновых и коротковолновых смещений для описания формирования двойникованных кристаллов высказывалась в [1].

Вторая глава диссертации посвящена рассмотрению модели управляющего волнового процесса (УВП), позволившей объяснить физические причины отбора одной из двух возможных ориентаций двойниковых границ.

Во вводной части, помимо напоминания известных экспериментальных фактов, отмечается, что принципиальную роль для развития модели сверхзвукового двойникования, не требующей наличия упорядоченной пространственной структуры колеблющихся s -ячеек, сыграла отмеченная в [2] (в качестве перспективного направления исследований) возможность подкачки энергии в s -ячейки за счет распространения волновых пучков вдоль взаимно ортогональных направлений $[110]_\gamma$ и $[\bar{1}\bar{1}0]_\gamma$. Эта возможность позволяет уже при учете пороговых деформаций понять, каким образом может возникнуть регулярная структура двойников превращения в пределах мартенситного кристалла при наличии единственной исходной активной s -ячейки.

В разделе 2.1 излагается суть концепции управляющего волнового процесса в модели налагающихся волновых пучков (с ортогональными направлениями скоростей распространения), несущих пороговые деформации типа растяжения ($\varepsilon_1 > 0$) и сжатия ($\varepsilon_2 < 0$). Подчеркивается, что за формирование габитусной плоскости отвечают пары относительно длинноволновых квазипродольных смещений (l -волны), с длинами волн λ_l порядка толщины мартенситного кристалла. В качестве волн, отвечающих за формирование тонкой двойниковой структуры, принимаются пары относительно коротковолновых продольных волн смещений (s -волны) с длинами волн λ_s порядка периода двойниковой структуры. Волновые векторы s -волн направлены строго вдоль осей $\langle 001 \rangle_\gamma$ — осей симметрии четвертого порядка. Скорость роста мартенситного кристалла равна векторной сумме скоростей квазипродольных l -волн, а скорость роста основной компоненты двойника \vec{v}_{tw} равна векторной сумме скоростей продольных s -волн, так что обе характерные скорости превышают скорость продольных звуковых волн. Нормаль к габитусной плоскости \vec{N}_{wl} выражается формулой

$$\vec{N}_{wl} \parallel \vec{n}_{2l} - \alpha_l \vec{n}_{1l}, \quad \alpha_l = \frac{v_{2l}}{v_{1l}}, \quad (1)$$

где v_{1l} и v_{2l} — модули скоростей распространения l -волн в \vec{n}_{1l} и \vec{n}_{2l} направлениях. Направления $\vec{n}_{1,2l}$ в модели гетерогенного зарождения в упругом поле отдельной дислокации принимаются коллинеарными единичным векторам вдоль главных осей растяжения $\vec{\xi}_1$ и сжатия $\vec{\xi}_2$

$$\vec{n}_{1l} \parallel \vec{\xi}_1, \vec{n}_{2l} \parallel \vec{\xi}_2, \vec{n}_{1l} \perp \vec{n}_{2l}, |\vec{n}_{il}| = |\vec{\xi}_i| = 1. \quad (2)$$

В условиях малости пороговых деформаций ε_{th} по сравнению с единицей имеет место соотношение

$$\varkappa_l = \frac{v_{2l}}{v_{1l}} \approx \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{|\varepsilon_2|}}. \quad (3)$$

Из применения (1)—(3) к s -волнам очевидно, что пара ортогональных s -волновых пучков задает ориентации $\{110\}_\gamma$ границ двойников.

В разделе 2.2 формулируется система уравнений, задающих управляющий волновой процесс при реконструктивных мартенситных превращениях. Учитывается, что в области решетки, теряющей устойчивость под действием УВП, неравновесная электронная подсистема обеспечивает сохранение высокого уровня амплитуд колебаний и соответствующих деформаций.

Тогда за основу берется пара волновых уравнений для волн, бегущих в \vec{n}_1 и \vec{n}_2 направлениях, которые без ограничения общности принимаются в качестве x - и y -направлений:

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t} + v_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} + b_1(\varepsilon_1, \varepsilon_2)u_1 = 0 \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} + v_2 \frac{\partial u_2}{\partial y} + b_2(\varepsilon_1, \varepsilon_2)u_2 = 0 \end{cases}, \quad (4)$$

где $u_{1,2}$ — смещения от положений равновесия, $v_{1,2}$ — модули скоростей продольных (квазипродольных) упругих волн, а $b_{1,2}$ — «эффективные» затухания волн, распространяющихся соответственно в x - и y -направлениях.

Параметры $b_{1,2}$ в отсутствие механизма усиления положительны, но удовлетворяют требованию $b_{1,2} \leq 0$ при выполнении условий генерации волн в области наложения волновых пучков с деформациями $\varepsilon_1 > 0$ и $\varepsilon_2 < 0$ (компенсации усиления и потерь соответствует $b_{1,2} = 0$). Взаимодействие волн отражается в (4) через зависимости коэффициентов $b_{1,2}$ от деформаций $\varepsilon_{1,2}$:

$$b_i(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \varkappa_i(1 - \Theta(\varepsilon_1 - \varepsilon_{th1})\Theta(\varepsilon_{th2} - \varepsilon_2)), \quad (5)$$

где $i = 1, 2$ и деформации $\varepsilon_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x}$, $\varepsilon_2 = \frac{\partial u_2}{\partial y}$. В (5) параметры $\varkappa_i > 0$ задают затухания волн в отсутствие механизмов усиления, а $\Theta(\varepsilon)$ — ступенчатая функция Хевисайда $\Theta(\varepsilon) = \begin{cases} 0, & \text{при } \varepsilon < 0 \\ 1, & \text{при } \varepsilon > 0 \end{cases}$

От системы (4) осуществляется переход к уравнениям для деформаций:

$$\begin{cases} \dot{\varepsilon}_1 + v_1 \varepsilon'_1 + b_1(\varepsilon_1, \varepsilon_2)\varepsilon_1 = 0 \\ \dot{\varepsilon}_2 + v_2 \varepsilon'_2 + b_2(\varepsilon_1, \varepsilon_2)\varepsilon_2 = 0 \end{cases}, \quad \dot{\varepsilon}_{1,2} \equiv \frac{\partial \varepsilon_{1,2}}{\partial t}, \varepsilon'_1 = \frac{\partial \varepsilon_1}{\partial x}, \varepsilon'_2 = \frac{\partial \varepsilon_2}{\partial y}. \quad (6)$$

При рассмотрении пороговых деформаций приемлемым считается упругое описание среды и, следовательно, использование гармонического

описания для $u_{1,2}$ и $\varepsilon_{1,2}$ при стандартной связи $\omega_{1,2} = v_{1,2}k_{1,2}$ между частотами колебаний $\omega_{1,2}$ и волновыми числами $k_{1,2}$.

Поскольку пороговые деформации, конечны, хотя и малы, для поперечных размеров $d_{1,2}$ начального возбужденного состояния в форме вытянутого прямоугольного параллелепипеда, построенного на векторах ξ_1, ξ_2, ξ_3 , выполняются неравенства $d_{1,2} < \lambda_{1,2}/2$. На рис. 1 для иллюстрации представлен случай $d_{1,2}$ близких к $\lambda_{1,2}/4$.

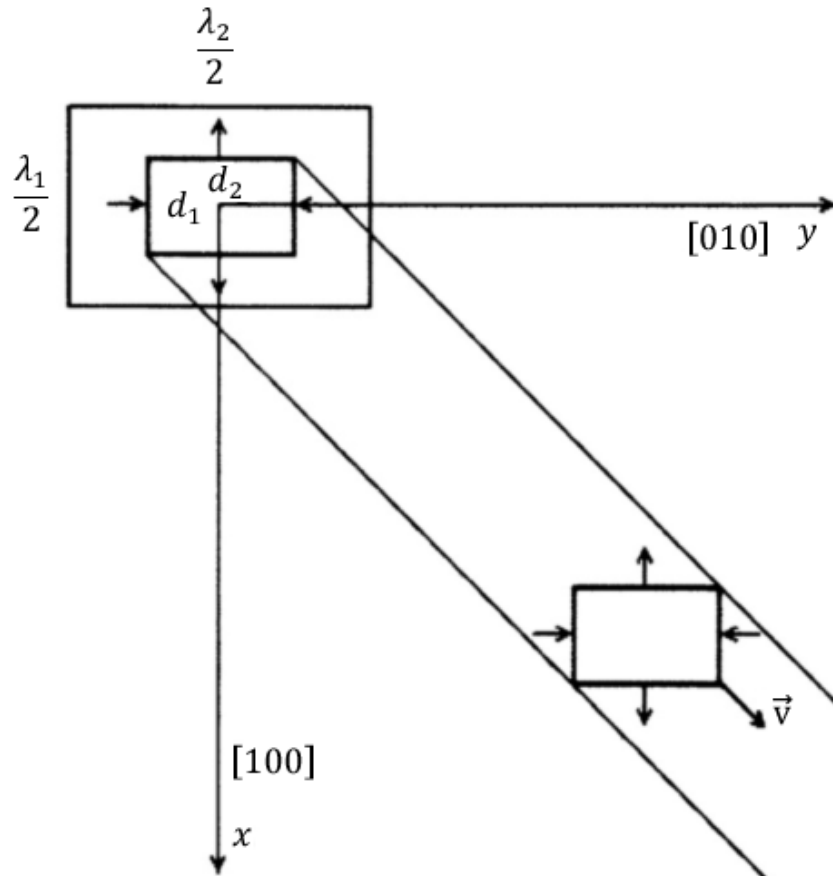


Рис. 1. Формирование пластинообразной области, теряющей устойчивость при распространении пороговой деформации.

Очевидно, что внутри пластинообразной области, сечение которой представлено на рис. 1, выполняются пороговые условия и, следовательно, решетка теряет устойчивость.

В разделе 2.3 обсуждается вопрос о снятии вырождения по ориентациям границ двойниковой структуры (ДС) при учете l -волны сжатия. Показано, что такая l -волна (с волновой нормалью \vec{n}_{2l}) осуществляет отбор в пользу одной из двух возможных ориентаций $(110)_\gamma$ и $(\bar{1}\bar{1}0)_\gamma$ границ раздела двойников. Поскольку при конечных деформациях в стесненных условиях (см., например, [3, 4]) имеет место поворот превращающейся решетки, связанный с направлениями распространения управляющих волн и характером переносимой ими деформации, должен выигрывать тот вариант, при котором в ходе поворота растет величина проекции оси бейновского сжатия на направление \vec{n}_{2l} , так как

при этом реализуется положительная обратная связь для развития процесса сжатия решетки.

Рис. 2 иллюстрирует сказанное. Как следует из рис. 2, ориентировка $\vec{N}_{ws} \parallel [1\bar{1}0]_\gamma$ (случай «б») нормали к границе раздела ДС подавляется, тогда как ориентировка $\vec{N}_{ws} \parallel [110]_\gamma$ активируется.

В заключительной части второй главы подводятся промежуточные итоги и отмечается возможность наложения s -пучков на область l -пучка с максимальным значением деформации, приводящая к возникновению новой стартовой ячейки для роста основной компоненты ДС.

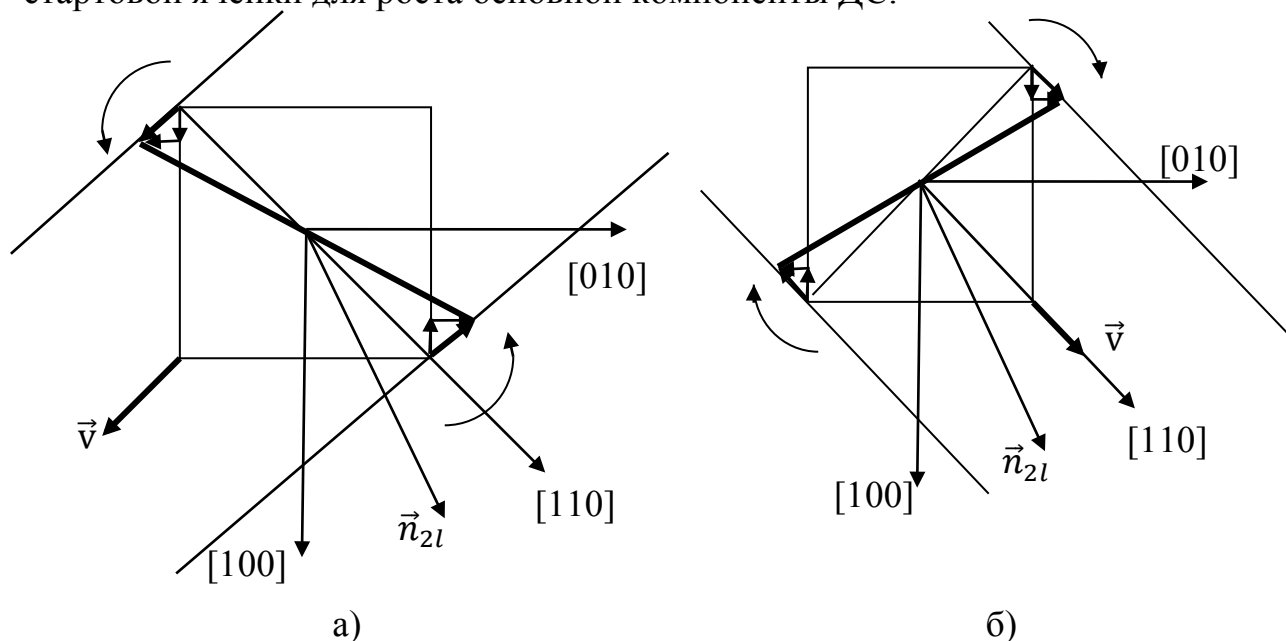


Рис. 2. Различие направлений разворотов решетки при двух вариантах ориентаций границ компонент ДС, сопровождающихся изменением угла между осью $[100]_\gamma$ и \vec{n}_{2l} : уменьшение в случае а) и увеличение в случае б)

Результаты, полученные во второй главе, опубликованы в [1—7].

Третья глава посвящена анализу моделей предпереходного состояния исходной фазы, совместимых с формированием регулярной двойниковой структуры со сверхзвуковой скоростью, и расчету соотношения β объемов двойниковых компонент при достижении пороговых деформаций на фронте УВП.

Во вводной части к главе отмечается, что фактически постановка задачи позволяет вести рассмотрение регулярных слоистых структур (РСС), частным случаем которых являются двойниковые структуры, поэтому под величиной β , в общем случае, понимается ожидаемое соотношение основной и дополнительной компонент РСС, причем пластинка основной компоненты испытывает мартенситное превращение, тогда как дополнительная компонента может представлять собой и тонкую прослойку сильно искаженного аустенита.

В разделе 3.1 обсуждаются возможные причины формирования упругих полей, задающих пространственный масштаб λ_s . Прежде всего, отмечается, что

среди продольных волн наименьшие значения скоростей имеют волны вдоль осей $\langle 001 \rangle_\gamma$, что естественно согласуется с данными экспериментов [5]. Следовательно, имеются условия для возникновения, по крайней мере, одной ячейки в форме вытянутого прямоугольного параллелепипеда с ребрами вдоль осей $\langle 001 \rangle_\gamma$ и необходимой фазировкой колеблющихся граней (с поперечными размерами $d_{1s} = d_{2s} < \lambda_s/2$ во много меньшими продольного размера $d_l < \lambda_l/2$). Активация подобной ячейки приводит к формированию основной компоненты двойника.

Обсуждается также вопрос о существовании термодинамически выгодных метастабильно устойчивых периодических статических s -смещений, предшествующих мартенситному превращению, описываемых структурой типа «шахматной доски» [6] с чередующимися s -ячейками, отличающимися характером деформаций. Делается вывод о целесообразности рассмотрения пробега l -волн как по решетке с «дышащими», так и со статическими системами ячеек, имеющих размеры d_s и d_l .

В разделе 3.2 обсуждается выбор пространственного масштаба $d_l < \lambda_l/2$ поперечного размера начального возбужденного состояния на основе концепции гетерогенного зарождения в упругом поле дислокации. Приводятся аргументы в пользу выбора d_l порядка $10^{-2}L$, где L — среднее расстояние между дислокациями. Кроме того, отмечается, что требование выполнения пороговых условий при деформациях на уровне 10^{-4} — 10^{-3} совместимо с возникновением начального возбужденного состояния с достаточно большим поперечным размером d_l , что увеличивает долю высвобождаемой при превращении энергии метастабильно устойчивой фазы. Еще одно важное замечание относится к возрастанию предела макроскопической текучести (и упругости) при уменьшении размера зерна.

В разделе 3.3 рассматривается соотношение долей компонент регулярной слоистой структуры (РСС) для различных вариантов начального распределения потенциально активных ячеек с s -колебаниями. Как и в [2], считается, что s -ячейка активируется в момент совпадения с ее центром области фронта l -волны сжатия с максимальным уровнем деформации. Направления l -волн для иллюстрации выбираются в виде:

$$\vec{n}_{1l} = [00\bar{1}]_\gamma, \quad \vec{n}_{2l} = [\cos\psi \sin\psi 0]_\gamma. \quad (7)$$

В частности, для $\vec{N}_{wl} \parallel [10\ 3\ 15]_\gamma$ угол ψ между \vec{n}_{2l} и $[100]_\gamma$ составляет $\approx 16,7^\circ$.

В модели системы статических s -ячеек, периодической в пространстве, отношение β (основной и дополнительной) компонент РСС имеет вид:

$$\beta(d_s) = 2d_s/(\lambda_s - 2d_s), \quad 1 \leq \beta(d_s) < \infty. \quad (8)$$

В предельном случае максимально возможных размеров $d_s \rightarrow \lambda_s/2$, когда $|\varepsilon_{2th}| \rightarrow 0$, значение $\beta(d_s) \rightarrow \infty$, то есть основные компоненты смыкаются, и дополнительная компонента исчезает. Нижняя граница значений

$d_{smin} = \lambda_s/4$ следует из условия $\beta(d_{smin}) = 1$ (по определению, основная доля не должна быть меньше дополнительной).

Проводится анализ и для случая пробега l -волн по решетке с периодической системой «дышащих» s -ячеек. Отмечается, что подобные модели имеют возможности физической реализации лишь в случаях фазовых переходов близких ко второму роду.

Таблица 1

Наборы значений параметров $tg\psi$, d_s/λ_s и $|\varepsilon_{2s}(d_s/2)|/|\varepsilon_{2s}|_{max}$, задающие «реперные» значения β

$tg\psi$	d_s/λ_s	$\frac{ \varepsilon_{2s}(d_s/2) }{ \varepsilon_{2s} _{max}}$	β	$tg\psi$	d_s/λ_s	$\frac{ \varepsilon_{2s}(d_s/2) }{ \varepsilon_{2s} _{max}}$	β
0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	∞	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{9}$	0.77	2
0	$\frac{1}{6}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	2	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{5}$	0.81	$\frac{3}{2}$
0	$\frac{3}{20}$	0.89	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	1
0	$\frac{1}{8}$	0.92	1	1	$\frac{1}{2}$	0	∞
$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	∞	1	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	2
$\frac{1}{3}$	$\frac{4}{15}$	0.67	4	1	$\frac{3}{10}$	0.59	$\frac{3}{2}$
$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	3	1	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	1

Применительно к фазовым переходам с ярко выраженными признаками первого рода предпочтение отдается модели с единственной выделенной в начальный момент времени активной s -ячейкой, способной периодически воспроизводиться (за счет наложения излучаемых s -волновых пучков в направлениях ортогональных границе двойников) в центральной области фронта УВП. В общем случае возникающая строго периодическая слоистая структура характеризуется соотношением объемов компонент β , зависящим только от параметра d_s/λ_s и направления распространения волны, отвечающей на мезомасштабе в составе УВП за деформацию сжатия:

$$\beta = 4(d_s/\lambda_s)/[1 + tg\psi - 4d_s/\lambda_s]. \quad (9)$$

При использовании гармонического приближения для описания волн в составе УВП знание величины d_s позволяет найти отношение модуля деформации $|\varepsilon_{2s}(d_s/2)|$ на границах активной ячейки к модулю деформации

$|\varepsilon_{2s}|_{max}$ в ее центре. Таблица 1 содержит «реперные» значения наборов существенных параметров.

На рис. 3.а приведено распределение основных (закрашенные области) и дополнительных (незакрашенные области) компонент возникающей структуры, при $d_s = \lambda_s / 4$, $\psi = 26,6^\circ$ и $\beta = 2$. На рис. 3.б увеличен фрагмент рис. 3.а, демонстрирующий условие воспроизведения активной s -ячейки, сводящееся к равенству времени прохождения со скоростью \vec{v}_{2l} гипотенузы прямоугольного треугольника с временем прохождения двух катетов треугольника со скоростью $v_{tw} = v_{1,2s}\sqrt{2}$.

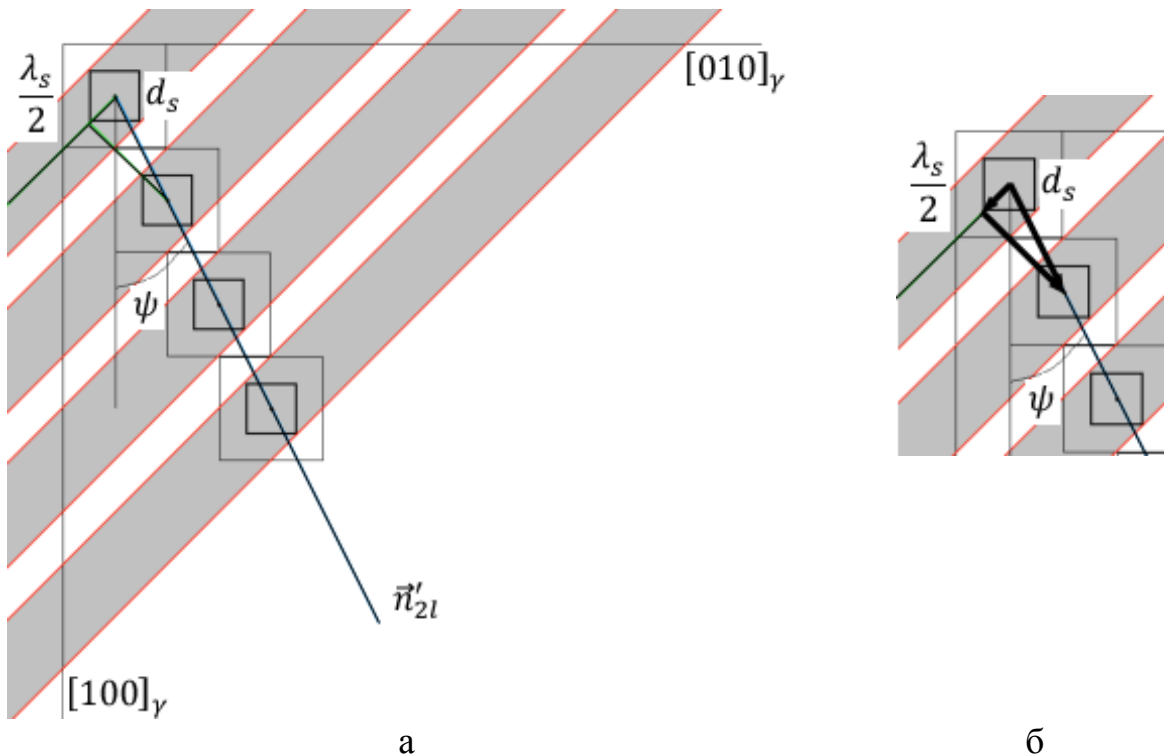


Рис. 3. Динамическая модель формирования РСС с параметром $\beta = 2$

Показано, что снижение уровня деформации при воспроизведении активной динамической ячейки за счет затухания s -волновых пучков в ближней волновой зоне оказывается порядка процента, что вполне приемлемо для реализации процесса формирования РСС.

В заключении к главе 3 после краткого перечисления результатов отмечается, что проведенный анализ позволяет пополнить перечень важнейших характеристик УВП, которые можно восстанавливать по наблюдаемым морфологическим признакам.

Результаты, полученные в третьей главе, опубликованы в [1, 8—10].

Четвертая глава посвящена волновой модели образования мартенситных кристаллов в неоднородной среде. Предполагается, что влияние плоских пространственных неоднородностей отражается учетом зависимости от пространственных координат эффективных затуханий управляющих волн,

описываемых системой (4). Это, в свою очередь, сказывается на реализации пороговых условий и сопровождается изменением форм профилей кристаллов.

В первом разделе приводятся варианты наблюдаемых отклонений профилей кристаллов от типичной пластинчатой формы.

Во втором разделе приводится описание используемых зависимостей, отражающих влияние неоднородности среды на эффективные коэффициенты затухания управляющих волн, а именно, экспоненциальной, квадратичной и обратной к квадратичной зависимостей $f\left(\frac{x-\bar{x}}{\lambda}\right)$, $f\left(\frac{y-\bar{y}}{\lambda}\right)$ от расстояний $x - \bar{x}$, $y - \bar{y}$ до плоскостей залегания неоднородностей $x = \bar{x}$, $y = \bar{y}$ (введение длины волны λ соответствует измерению расстояний в единицах λ). По сравнению с (5) эффективные затухания обобщаются и для симметричного по отношению к направлениям x и y принимают вид:

$$\begin{cases} b_1(\varepsilon_1, \varepsilon_2, x) = \varepsilon_1 \left[1 - \frac{\sigma_0}{\sigma_{th}} \Theta(\varepsilon_1 - \varepsilon_{th1}) \Theta(\varepsilon_{th2} - \varepsilon_2) + \delta_0 f\left(\frac{x-\bar{x}}{\lambda}\right) \right] \\ b_2(\varepsilon_1, \varepsilon_2, y) = \varepsilon_2 \left[1 - \frac{\sigma_0}{\sigma_{th}} \Theta(\varepsilon_1 - \varepsilon_{th1}) \Theta(\varepsilon_{th2} - \varepsilon_2) + \delta_0 f\left(\frac{y-\bar{y}}{\lambda}\right) \right] \end{cases} \quad (10)$$

где σ_0 , σ_{th} — соответственно, начальная и пороговая инверсные разности населенностей электронных состояний, активных в генерации фононов, а δ_0 характеризует интенсивность неоднородности, $d_1 = d_2$, $|\vec{v}_1| = |\vec{v}_2|$, $|\vec{v}| = \sqrt{2}|\vec{v}_{1,2}|$. В этом случае достаточно рассмотреть одно из уравнений (4), считая, что в (10) $\Theta(\varepsilon_1 - \varepsilon_{th1})\Theta(\varepsilon_{th2} - \varepsilon_2) = 1$, $\sigma_{th} - \sigma_0 \leq 0$, и опуская индексы 1, 2 для деформаций в ортогональных направлениях, т.е.

$$\dot{\varepsilon} + v\varepsilon' + b(x)\varepsilon = 0, \quad b(x) = \varepsilon \left[1 - \frac{\sigma_0}{\sigma_{th}} + \delta_0 f\left(\frac{x-\bar{x}}{\lambda}\right) \right]. \quad (11)$$

Получаемая с помощью (11) величина $d_{1,2}$ в $\sqrt{2}$ раз меньше толщины d прообраза кристалла. Решение (11) ищется в виде $\varepsilon(x, t) = \tilde{\varepsilon}(x, t) \cos(\omega t \pm kx)$, амплитуды $\tilde{\varepsilon}(x, t)$ считаются достаточно медленно изменяющимися, изменением частоты ω пренебрегается, знаки \pm при записи фазы волны отражают возможность распространения в направлениях $\pm \vec{k}$.

В разделе 3 приводятся результаты расчетов профилей кристаллов, получаемых в рамках модели УВП с использованием выбранных вариантов описания неоднородности среды.

Поскольку при распространении УВП интерес представляет достижение только пороговых значений, превышение которых качественно меняет картину процесса, для оценки размера $d(x)$ достаточно найти неустойчивое стационарное решение уравнения (11).

Решение (11) для экспоненциального вида функции f иллюстрируется на рис. 4. Для лучшего согласованного восприятия плоского рис. 4.а, и трехмерного ракурса, выбранного на рис. 4.б, ориентация оси x на рис. 4. противоположна традиционному выбору.

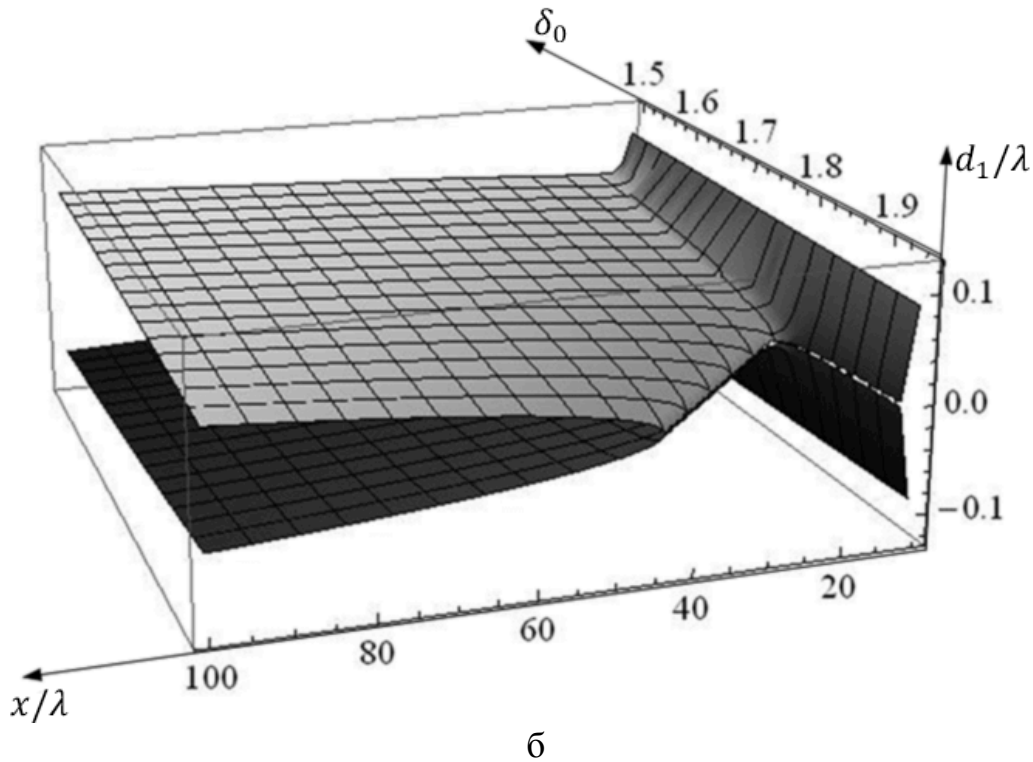
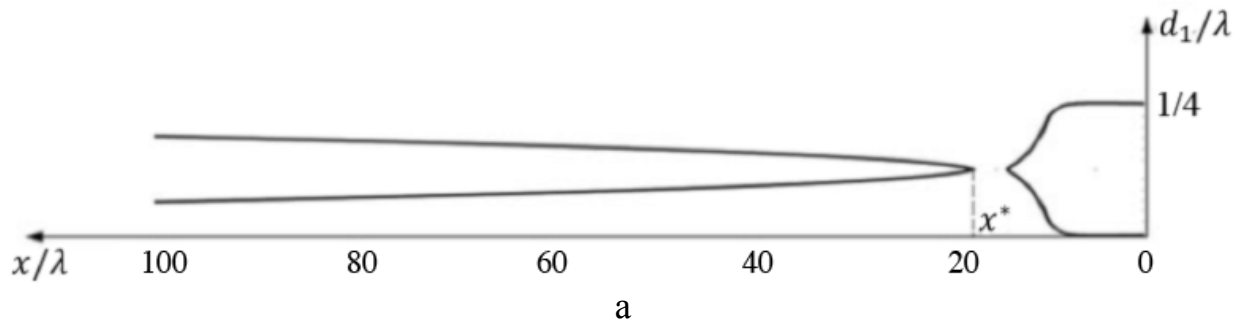


Рис. 4. Зависимость $\tilde{d}_1(\tilde{x})$ для экспоненциального вида функции $f\left(\frac{x-\tilde{x}}{\lambda}\right) = \exp\left(\frac{-|x-\tilde{x}|}{\lambda}\right)$, при параметрах $\tilde{x} = 10$, $\frac{\sigma_0}{\sigma_{th}} - 1 = 10^{-3}$, а) $\delta_0 = 1,82 \cdot 10^2$, б) $1,5 \cdot 10^2 \leq \delta_0 \leq 1,95 \cdot 10^2$

Левая часть рис. 4.а соответствует либо начальному возбужденному состоянию, центр которого x может быть локализован в любой точке области $x^* \leq x < \infty$ (при $x \rightarrow \infty$, $d \rightarrow \lambda/2$), если кристалл растет в направлении убывания x , либо состоянию с центром x , локализованным в точке x^* , если кристалл растет в направлении возрастания x . Правая часть рис. 4.а соответствует характерному поведению $\tilde{d}_1(x)$ в непосредственной близости от центра неоднородности. Из рис. 4.б видно, что снижение параметра δ_0 сохраняет возможность формирования мартенситного кристалла во всей области изменения x , при этом ширина профиля кристалла $\tilde{d}_1(x)$ меняется немонотонно, достигая для каждого значения δ_0 минимума в некоторой точке x , расположенной между x^* и \tilde{x} . Подобное сужение кристалла обусловлено

прохождением области залегания неоднородности ($\tilde{x} = 10$), в которой затухание максимально.

В четвертом разделе проводится сравнение форм профилей кристаллов, рассчитанных в волновой модели роста мартенсита, с наблюдаемыми. Приведенные в разделе 3 формы профилей получены в приближении пороговых деформаций и соответствуют прообразам профилей реальных кристаллов.

На рис. 5 осуществлено сопоставление рассчитанной формы профиля с наблюдаемым вариантом формы профиля мидриба.

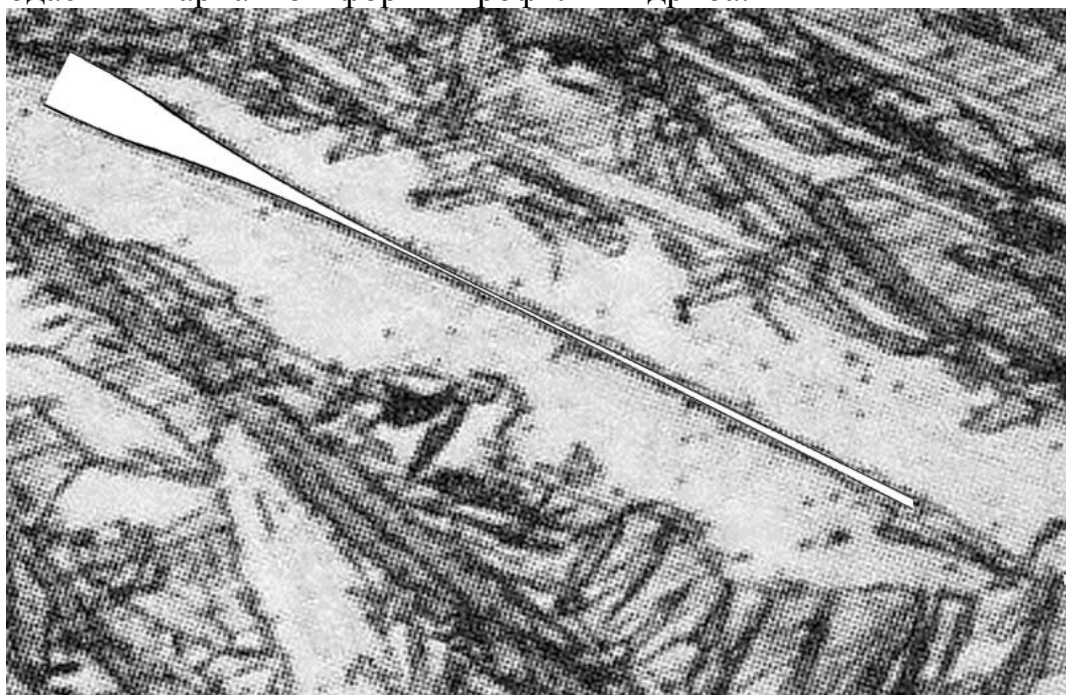


Рис. 5. Сравнение расчетной (выделенной белым цветом) и наблюдаемой [7] форм двойникового мидриба в сплаве Н32, закаленном от 1200 °С после охлаждения до –100 °С, для модели неоднородности с экспоненциальной зависимостью при параметрах $\tilde{x} = 10$, $\frac{\alpha}{v} \left(\frac{\sigma_0}{\sigma_{th}} - 1 \right) = 10^{-3}$, $\delta_0 = 1,81 \cdot 10^2$ (увеличение x400)

Этот пример подтверждает, естественным образом, следующую из динамической теории возможность немонотонного изменения толщины профиля продвойникового кристалла мартенсита за счет изменения эффективных затуханий длинноволновых компонент УВП при распространении в неоднородной среде.

Рис. 6 иллюстрирует близость расчетной формы профиля кристалла 1, немонотонно изменяющего толщину при прохождении через образовавшийся ранее кристалл 2, с наблюдаемой.

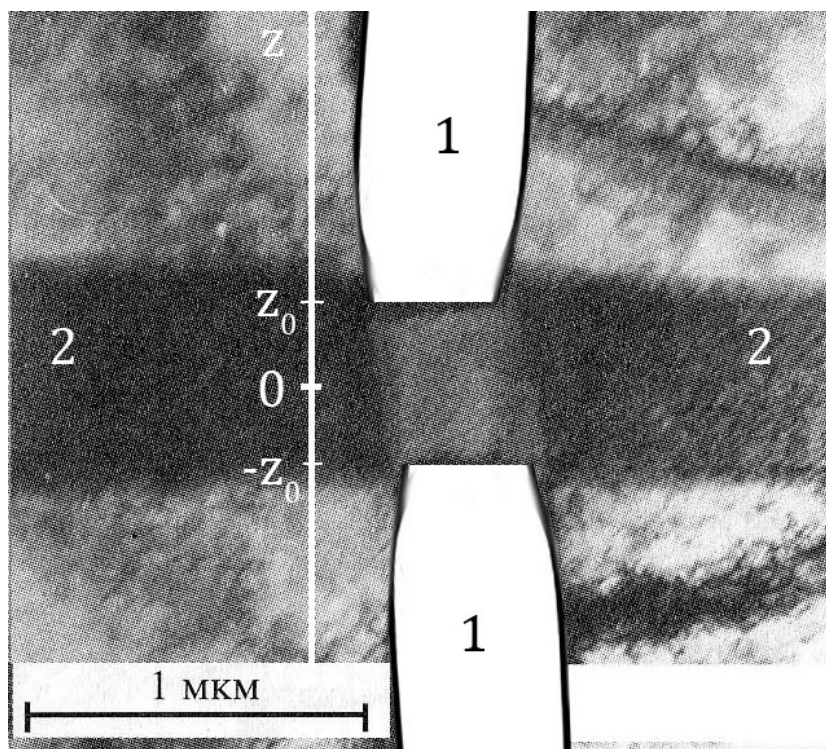


Рис. 6. Сравнение расчетных и наблюдаемых [7] профилей пересекающихся мартенситных кристаллов: в тонкой пластинообразной области $-z_0 \leq z \leq z_0$ амплитуды управляющих волн полагаются постоянными. Использованы значения параметров $\frac{\alpha}{v} \left(\frac{\sigma_0}{\sigma_{th}} - 1 \right) = 10^{-3}$, $\delta_0 = 1,2 \cdot 10^2$ при экспоненциальном виде функции f

В заключении к главе 4 отмечается, что полученный расчетным путем набор форм профилей достаточно представительен и имеется, по крайней мере качественное, соответствие между формами профилей, рассчитанных в волновой модели роста мартенситных кристаллов, и наблюдаемыми. Полученные результаты дают возможность дополнить схемы восстановления динамической картины мартенситной реакции по набору морфологических данных, впервые предложенные в [1].

Результаты, полученные в четвертой главе, опубликованы в [11—14].

Заключение

Предложен и развит подход к описанию формирования РСС, включая двойниковые структуры. Кроме того, впервые проведен расчет ожидаемых профилей кристаллов мартенсита, формирующихся в неоднородной среде.

Основные выводы.

1. Показано, что учет стесненного характера деформации области решетки, теряющей устойчивость, приводит к развороту решетки превращающейся области.

2. Обоснован отбор одной из двух возможных ориентировок границ компонент двойниковой структуры как следствие положительной обратной связи для реализации развивающейся бейновской деформации.
3. Впервые предложена реалистическая модель сверхзвукового формирования регулярной структуры двойников превращения, совместимая со сверхзвуковой скоростью формирования тонкопластинчатого мартенситного кристалла либо мидриба (центральной двойникованной пластинчатой области) линзовидной мартенситной пластины.
4. Для ряда моделей неоднородности среды рассчитаны формы профилей мартенситных кристаллов и проведено сравнение с типичными наблюдаемыми вариантами профилей.
5. Полученные результаты позволяют сделать важный методологический вывод о расширении возможностей постановки обратной задачи — реконструкции характера пространственной неоднородности образца по особенностям наблюдаемых форм сечений кристаллов.

В завершение отмечается возможность использования богатого арсенала физической акустики для решения разнообразных задач взаимодействия растущих кристаллов между собой и существующими неоднородностями на основе модели УВП, включающей длинно- и коротковолновые компоненты.

Литература

1. Кащенко М. П. Волновая модель роста мартенсита при $\gamma - \alpha$ превращении в сплавах на основе железа. — Екатеринбург.: УИФ «Наука», 1993. — 224 с.
2. Чашина В. Г. Динамические модели формирования двойников превращения и полос неоктаэдрического сдвига. Дисс. на соискание степени к. ф.-м. н. Екатеринбург. 2000. — 122 с.
3. Kashchenko M. P., Chashchina V. G. The material orientation relationship for the bcc-hcp transformation // arXiv: 0707. 1938 v 1 [cond-mat. mtrl-sci] 13 Jul 2007.
4. Кащенко М. П., Чашина В. Г. Кристаллодинамика ОЦК-ГПУ мартенситного превращения. II. Морфология мартенсита // ФММ. 2008. Т. 106. № 1. С. 16—25.
5. Тяпкин Ю. Д., Пушин В. Г., Романова Р. Р., Буйнов Н. Н. Исследование структуры γ и α фаз в сплавах железо-никель вблизи точки мартенситного превращения. 1. Диффузное рассеяние электронов и рентгеновских лучей // ФММ. 1976. Т. 41. В. 5. С. 1040—1047

6. Saxena A., Shenoy S. R., Bishop A. R., Lookman T. A model of shape memory materials with hierarchical twinning: statics and dynamics // J.Phys. (Fr). 1995. V.5. № 12 P. 125—130.
7. Счастливцев В. М., Калетина Ю. В., Фокина Е. А. Мартенситное превращение в магнитном поле. Екатеринбург: УрО РАН, 2007. 322 с.

Список публикаций автора диссертации

1. Кащенко М. П., Чащина В. Г., Вихарев С. В., Иванов С. В. Динамические модели формирования двойникованных кристаллов при мартенситных превращениях // XVII Петербургские чтения по проблемам прочности. Санкт-Петербург, 10—12 апреля 2007 г.: сборник материалов. Ч. II. — СПб., 2007. С. 278—280.
2. Кащенко М. П., Чащина В. Г., Вихарев С. В. Система уравнений, задающих управляющий волновой процесс при реконструктивных мартенситных превращениях // Сб. трудов XLVI Международной конференции «Актуальные проблемы прочности», 15—17 октября 2007 г., Витебск, Беларусь: материалы конференции. Ч.2. / УО «ВГТУ». — Витебск, 2007. С. 105—109.
3. Кащенко М. П., Вихарев С. В., Чащина В. Г. Динамические модели формирования двойниковой структуры мартенситных кристаллов в сплавах на основе железа // Сб. трудов XLIV Международной конференция «Актуальные проблемы прочности» 3—7 октября 2005 г. Вологда. С. 174.
4. Kashchenko M. and Vikharev S. A dynamic model of the formation of a twinned martensite structure in an iron alloy // Program and Abstracts. ESOMAT 2006 (Sept.10—15, 2006), Bochum/Germany. P.143.
5. Кащенко М. П., Чащина В. Г., Вихарев С. В. Кристаллодинамическая модель отбора ориентации границ двойниковой структуры при формировании мартенситного кристалла // Известия вузов. Физика. 2009. № 8. С. 94—95.
6. Кащенко М. П., Чащина В. Г., Вихарев С. В. Снятие вырождения по ориентациям границ двойников превращения при распространении управляющего волнового процесса // Физика прочности и пластичности материалов: сб. тез. XVII межд. конф. / отв. редактор Штеренберг А.М. — Самара: Самарский гос. тех. ун-т, 2009. С. 163.
7. Кащенко М. П., Чащина В. Г., Вихарев С. В. Динамические модели формирования двойникованных кристаллов. I. Управляющий волновой процесс и снятие вырождения по ориентации двойниковых границ при мартенситных превращениях // ФММ. 2010. Т. 110. В. 3. С. 212—222.
8. Кащенко М. П., Чащина В. Г., Вихарев С. В. Соотношение компонентов слоистой структуры, формируемой управляющим волновым процессом в

- метастабильно устойчивом аустените // Известия вузов. Физика. 2009. № 9. С. 96—97.
9. Кащенко М. П., Чащина В. Г., Вихарев С. В. Сверхзвуковой механизм формирования регулярной слоистой структуры при распространении управляющего волнового процесса в метастабильно устойчивом аустените // Международный симпозиум «Перспективные материалы и технологии», Витебск, 25—29 мая 2009 г.: сборник тезисов УО «ВГТУ» / гл. ред. В.В. Рубаник. — Витебск, 2009. С. 191.
 10. Кащенко М. П., Чащина В. Г., Вихарев С. В. Динамические модели формирования двойникованных кристаллов. II. Предпереходные состояния и соотношения объемов двойниковых компонент // ФММ. 2010. Т. 110. В. 4. С. 323—335.
 11. Кащенко М. П., Чащина В. Г., Вихарев С. В. Динамическая модель образования мартенситных кристаллов клиновидной формы (краевой эффект) // Сб. трудов конф. XIV Бернштейновские чтения по термической обработке металлических материалов. Москва, 27—29 октября 2009 г. Тезисы. М.: НИТУ «МИСиС». С. 144.
 12. Chashchina V., Kashchenko M., Vikharev S. Wave model of forming of the martensite crystal in the heterogeneity medium // ArXiv: cond-mat 1003.2952v3. 2010. 5 p.
 13. Кащенко М. П., Чащина В. Г., Вихарев С. В. Волновая модель образования мартенситных кристаллов в неоднородной среде // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2010. Т. 7. В. 1. С. 7—11.
 14. Кащенко М. П., Чащина В. Г., Вихарев С. В. Сравнение форм профилей кристаллов, рассчитанных в волновой модели роста мартенсита, с наблюдаемыми // Металловедение и термическая обработка металлов. 2010. № 8. С. 11—15.

Подписано в печать 28.10.2010. Формат 60x84 1/16

Гарнитура «Times». Усл. печ. л. 1,2.

Тираж 100 экз. Заказ №972

Отпечатано в типографии ИПЦ «Издательство УрГУ»

620000, Екатеринбург, ул. Тургенева, 4